

さがけ「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」
研究領域事後評価報告書

総合所見

本研究領域は、(I)多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製、(II)情報デバイスの超低消費電力化や多機能化の実現に向けた、素材技術・デバイス技術・ナノシステム最適化技術等の融合による革新的基盤技術の創製、(III)分野を超えたビッグデータ利活用により新たな知識や洞察を得るための革新的な情報技術及びそれらを支える数理的手法の創出・高度化・体系化、(IV)環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計「分子技術」の構築、の複数の戦略目標を基に発足した。

上記戦略目標を受け、実験科学、理論化学、計算化学、データ科学の連携・融合によって、それぞれの手法の強みを生かしつつ相互に得られた知見を活用しながら新物質・材料設計に挑む先進的マテリアルズインフォマティクス(MI)の基盤構築と、それを牽引する将来の世界レベルの若手研究者の輩出を目指した。

本研究領域は、MIの基盤技術の構築を目指して研究課題の募集当初から、研究アプローチを縦軸に、対象とする物質・材料系を横軸にした二次元のポートフォリオをデザインして採択にあたった。これにより、各種対象物質・材料に対して、種々の研究アプローチが試行出来る土俵が形成され、大変バランスの良い研究課題を配置できた。MIの基盤技術における研究アプローチは、従来からの物質・材料研究をデータ科学的手法によって加速化させるとともに、学術的にも深化させて行くべきものであるが、この両面を包含した研究アプローチの研究課題の採択がなされている。学術分野は、物性物理学、材料科学、分子科学に跨がり、広範な物質・材料群を対象としている。研究領域としての枠の設定も十分であり、それに応える研究課題の採択が的確に進められた。第1期は理論・シミュレーションが主体であったが、MIが世の中で広く認知されはじめた第2期、そして第3期には、情報科学および実験(実際の合成)の割合を増やし、期を通じてバランスの良いものとなった。

また、ポートフォリオに沿って、それぞれの専門性を有した領域アドバイザーもバランスよく配置されており、領域会議などでの的確な助言や指導、研究者間の交流促進にも成功している。

研究総括および領域アドバイザーは、研究者の自主性に重きを置くマネジメントを推進すると共に、研究者間のコミュニケーションを促進した。これらにより、研究者による自発的な勉強会が発足され、さらに本研究領域で必須の異分野融合となる研究者間の多数の共同研究へ発展したことは本研究領域のマネジメントの成果と言える。

上記の4つの戦略目標をカバーするように、ナノカーボン合成触媒の発見、転移学習とベイズ最適化の組み合わせによる界面構造の高速予測、機械学習に必要な物質・材料に関する

記述子の構築手法、機械学習を応用したバーチャルスクリーニングによる有機太陽電池の探索の成功他、複数の顕著な研究成果が得られている。これらいくつかの顕著な研究成果に対し、文部科学大臣表彰若手科学者賞、日本学術振興会賞、本多記念奨励賞、日本金属学会功績賞を含む様々な賞を 19 名の研究者が受賞している。

各研究者は、互いに刺激し合いながら、個人研究として多様な挑戦的テーマに取り組んだ。その結果、領域内共同研究に発展したケースも含めて、研究成果は 381 報の国際的な学術雑誌への論文として発表された。加えてプレスリリース、書籍、総説・解説としての情報発信も多数行った。また、公開シンポジウムに関しても、企業からの参加が多く、本研究領域への関心の高さを示している。これらは、社会への発信として効果的であると同時に、若手研究者の情報発信マインド醸成の意義も大きかった。本研究領域でのこれら情報発信が、国内での MI の認知・活用を進ませ、MI の裾野を広げる役割となったことは特筆に値する。

多くの研究者は、上記の他、合計 149 件の招待講演を行い、現在の MI 分野を牽引している。採択研究者の内、研究期間中に 4 名が教授、14 名が准教授に昇任し、新物質・材料設計に挑戦する先進的 MI を牽引する若手リーダーが着実に輩出されている。

以上を総括し、本研究領域は総合的に優れていると評価できる。

1. 研究領域としての成果について

(1) 研究領域としての研究マネジメントの状況

本研究領域では、研究課題の募集当初から、研究アプローチを縦軸に、対象とする物質・材料系を横軸にした二次元のポートフォリオを作成し進めることで、物性物理学、材料科学、分子科学の広範な学術分野をカバーし、各種研究アプローチによって各々を学術的に深化させるバランスの良い適切な研究課題の採択ができています。

領域アドバイザー 11 名の内訳は、計算科学者 4 名、理論科学者 2 名、情報科学者 3 名、実験科学者 2 名 であった。研究総括の専門性(理論、計算)を考慮すると、やや実験科学者の割合が少ない傾向はあったが、本研究領域発足時の MI 研究の初期は、理論・計算が主体で推進されていたため、当時としては妥当だったと考えられる。

研究総括の研究推進方針として「産業応用に資する物質・材料を創出する」という視点も掲げ、産業界から、もしくは、産業界を経験した領域アドバイザーを複数名配置した。これは、研究推進方針に伝えるとともに、バランスが取れた配置であったと考えられる。

領域会議(年 2 回)においては、研究総括および領域アドバイザーは、研究者の研究成果を仔細に評価し、その評価を基に各研究者の進捗状況の把握・指導を適切に行った。

研究課題の進捗状況の把握と評価に関しては、定期的な領域会議やシンポジウムの開催により適切になされたと判断する。単なる研究報告だけでなく、進捗のフォローアップや的確な助言がなされ、研究総括、研究メンバー、領域アドバイザーを含めた相互交流がなされた。コロナ禍の取組みにおいてもオンラインを活用し、継続的にコミュニケーションを行った。

また、研究者の自主性に重きを置くマネジメントを推進すると共に、研究者間のコミュニケーションを促進した。これらより、研究者による自発的な勉強会が発足され、さらに本研究領域内で多数の共同研究へ発展し、複数の研究成果が生み出されたことは本研究領域のマネジメントの成果と言える。MI は、材料・物性科学と情報科学、計算化学との異分野融合が必須であるため、大変に望ましいことである。一方で海外研究者との共同研究の実績が見受けられなかったが、各研究者の今後の国際的活躍に期待したい。

本研究領域が主催した2回の国際シンポジウムは、企業関係者、広範な分野の研究者がそれぞれ3日間で500人以上の参加者を数えており、本研究領域への関心の高さを示した。プレスリリース28件、書籍・総説記事等56件、招待講演149件と多くの研究成果の公開を行った。

戦略目標達成に向けたいくつかの顕著な研究成果に対して、文部科学大臣表彰若手科学者賞、日本学術振興会賞、本多記念奨励賞、日本金属学会功績賞を含む様々な賞を19名の研究者が受賞している。

これらは、研究成果の発信にとどまらず、現在のMI分野の牽引役になるとともに、関係分野への研究者のアピール、MI分野での本研究領域のプレゼンス向上に大きく貢献した。また、若手研究者の情報発信マインド醸成の意義も大きいものであった。

人材の輩出・成長に関しては、昇任が採択研究者の内5割におよび、人材の輩出・成長の観点からも成果があった。採択研究者の内、研究期間中に4名が教授、14名が准教授に昇任した。女性研究者の活躍も素晴らしく、研究に参加している2名両者とも賞を受賞し、キャリアアップしている。これらのことから、新物質・材料設計に挑戦する先進的MIを牽引する若手リーダーが着実に輩出されていると言える。

以上により、本研究領域の研究マネジメントは優れていると評価できる。

(2) 研究領域としての戦略目標の達成状況

研究成果の科学的・技術的な観点では、まず機械学習を応用したバーチャルスクリーニングにより有機太陽電池の探索に成功した研究成果(佐伯)を挙げることができる。この研究成果は、「環境・エネルギー材料の分子の自在設計」に関する戦略目標への着実なアプローチを感じさせる。

機械学習に必要な元素・結晶構造・化合物記述子 (Descriptor) の構築手法の提案(世古)は、MI研究における基本的で重要な研究成果であり、材料物性予測手法の基盤技術としてインパクトが強い。実際の材料では粒界等での界面構造が本質である一方で、その構造は大変に複雑なためその決定が困難であった。今後材料分野での広い活用を望む。

転移学習とベイズ最適化の組み合わせ(溝口)は、界面構造を高速に予測する手法の成果として結実したが、この手法は今後種々の材料系において応用が期待され、材料分野への波及効果が高い。

また、解釈可能な機械学習モデリングの取組み(岩崎)は、戦略目標として掲げられている「新たな知識や洞察を得るための革新的な情報技術の構築」の実現に大変重要である。解釈可能性はモデルにおいて重要な特徴量の抽出にも深く関係し、バーチャルスクリーニングやパラメータの絞り込み等にも有効であり、社会的インパクトにも繋がる。この点は国際的にも本研究領域の研究オリジナリティが発揮できるポイントであり、今後の展開が楽しみである。

この他、研究総括がねらいとしていた新規材料探索手法の開拓と新物質の発見(スピン熱電材料、TADF 材料、ナノカーボン合成触媒の発見など)、材料・物性の特徴抽出手法(界面構造、ガラス・液体構造など)や計測におけるビックデータの処理(SOR や TEM による大量データの自動解析手法など)において多くの研究成果が生み出された。これらの研究成果は、4つの戦略目標をカバーしている。また、海外研究と比しても高い水準の成果を挙げたと言え、国際的な学術論文数が延べ 381 報であった。研究者数が全 41 名から単純平均すると、一人当たり 9 報となる。3.5 年の研究期間において定量面からも、十分な成果と言える。

研究成果の社会的・経済的な観点では、本研究領域での多くのプレスリリース、書籍・総説記事、招待講演、公開シンポジウム、受賞などは、揺籃期であった MI 研究にとって重要な情報発信源となり、国内での MI の認知・活用を進ませ、MI の裾野を広げる役割を担ったことは特筆に値する。

本研究領域では多数のデータベースやデータ解析ソフトウェアが作成され、その中で一部は公開、もしくは公開準備中である。既に公開されたものとしては、酸化物計算材料データベース、磁気構造データベース、放射光 X 線イメージングのデータ解析ソフトウェア、スペクトルイメージングから化学成分を同定するソフトウェアなどを含み 8 件となっている。

一方、上記以外の構築・蓄積されたデータベースの多くが個人利用にとどまっている。データベースの維持・運用には一定の労力とコストが必要であり、さきがけは個人研究であるため、この状況は理解しうるものである。開発されたソフトウェアなども含め、これを我が国の MI の土壌と考えるならば、我が国における材料開発の国際競争力向上のために、国の施策として、今後、強い支援策が必須である。

特許出願は 7 件にとどまっているが、さきがけ研究はアカデミックな基盤研究が主であるため、この状況は理解しうる。本研究領域で得られた知見・技術から、新たな知財が今後、生み出されることに期待したい。

以上のことから、本研究領域の戦略目標の達成状況は高い水準にあると評価できる。

2. その他

本研究領域の活動や研究成果などにより、現在、マテリアルズインフォマティクス (MI) は、材料探索のための方法論として広く認知されるようになってきた。MI は、様々な分野の領域横断・融合が必要であることは言うまでもない。さらなる普及には、例えば、

- ・シミュレーションフル活用によるデジタルツインの加速
(デジタルツイン：フィジカル空間のモニタリング、シミュレーションなどを行うためサイバー空間内にフィジカル空間の情報の環境を再現すること)
- ・自律型ロボット実験などによるハイスループット実験
- ・少ないデータセットでも予測精度が高い新規 AI アルゴリズム
- ・自然言語処理による文献からのデータ抽出
- ・理論計算データの蓄積とデータベースとしての共有化
- ・量子コンピュータ(量子アニーリングマシン)による最適設計

など、今後、さらに多岐に渡る分野の融合による研究開発が必須となる。

また、材料・デバイスなどのものづくり産業に MI を活かすには、プロセスや生産といった領域まで視野を広げることが必須となる。このためには、産業界を広く巻き込んだ活動・連携が強く求められる。これらの達成には、研究総括が主張しているように、分野の壁を超えたコミュニケーションが必須となる。今後、そのような場を設けることが MI の持続的発展にとって喫緊の課題である。

また、社会への成果還元の観点から、本研究領域で開発された新規手法、関連ソフトウェアの普及やデータベースの公開が準備されており、これらは今後物質・材料研究における我が国のパラダイム進化に大きく寄与するものと思われる。この意味で、ソフトウェア、データベースの維持管理、そしてアップデートの取組みや利用・活用の普及活動に対しても継続的サポートが望まれる。今後 MI の着実な展開のためには国の施策として、MI コミュニティへの継続的な支援を強く望むものである。

以上